

# Calcul intensif pour la modélisation du milieu interstellaire

François Levrier(1), Franck Le Petit(2), Fabrice Roy (3), Patrick Hennebelle (4), Pierre Lesaffre (5)

(1) *francois.levrier@ens.fr, LERMA/LRA, UMR 8112, ENS / Observatoire de Paris*

(2) *franck.lepetit@obspm.fr, LUTH, Observatoire de Paris / UMR 8102 / Université Denis Diderot*

(3) *fabrice.roy@obspm.fr, LUTH, Observatoire de Paris / UMR 8102 / Université Denis Diderot*

(4) *patrick.hennebelle@cea.fr, AIM UMR 7158, CEA Saclay*

(5) *pierre.lesaffre@ens.fr, LERMA/LRA, UMR 8112, ENS / Observatoire de Paris*

## Overview :

The ever-increasing amount of observational data pertaining to the structure, composition and dynamics of the interstellar medium (ISM) is not only a challenge for observers, but also one for theorists, whose models of the ISM need constant refining, taking into account magnetohydrodynamical (MHD) turbulence, chemical evolution, and coupling to the radiation field. We describe here how we made use of various computing resources (national and meso-centers, as well as grid computing) to tackle this complex problem, in the framework of the formation of dense structures within the diffuse medium. We have used national computing centers CINES, IDRIS, the meso-center MESOPSL and a local 256-processor cluster to perform 3D simulations of interstellar MHD turbulence. Some of these simulations are publically available on the STARFORMAT database. We have extracted realistic density profiles out of one of them, and have used the EGI-Inspire grid to compute the expected chemical abundances on these profiles via a post-processing with the Meudon PDR code. This approach is one of the possible ways to couple dynamics and chemistry in current models of the ISM.

## Enjeux scientifiques, besoin en calcul, stockage et visualisation :

Le milieu interstellaire (MIS) est un système complexe, à la croisée de thématiques centrales en astrophysique, telles que la formation des étoiles et l'évolution des galaxies. Les processus physiques et chimiques à l'oeuvre dans le MIS, et qui régissent sa composition, sa structure et sa dynamique, sont fondamentalement couplés, et couvrent une vaste plage d'échelles, tant spatiales que temporelles. Les défis soulevés par la modélisation du MIS sont ainsi colossaux, et constamment renouvelés par l'augmentation de la masse de données observationnelles (résultats des missions spatiales Herschel et Planck, et premières observations avec l'interféromètre ALMA).

L'injection d'énergie cinétique à grande échelle par la rotation différentielle de la Galaxie et à plus petite échelle par les explosions de supernovae et les vents stellaires entretient une turbulence magnétisée dans le MIS, qu'il est nécessaire de dissiper pour aboutir à la formation des étoiles. Le MIS est ainsi un fluide diffus de gaz et de poussières, partiellement ionisé, magnétisé, et dont la composition est le fruit d'une chimie hors-équilibre complexe, très éloignée des conditions du laboratoire. Cette chimie est initiée par divers processus qui injectent de l'énergie dans le milieu (rayonnement UV des étoiles, rayons cosmiques, dissipation de la turbulence interstellaire) et, en retour, elle influence l'évolution dynamique du gaz, car certaines espèces ( $C^+$  et O par exemple) participent de façon fondamentale à son refroidissement, condition indispensable à l'effondrement des nuages interstellaires et à la formation de structures denses préstellaires.

La modélisation du MIS requiert ainsi de traiter correctement le couplage entre magnétohydrodynamique (MHD), gravité, et chimie hors équilibre en phase gazeuse et sur les grains de poussières. La chimie doit de plus prendre en compte les photo-réactions, et donc les mécanismes d'interaction entre le rayonnement UV et la matière. Cette modélisation ne saurait être entreprise via des simulations numériques de manière brutale, en raison du nombre de variables mises en jeu (abondances chimiques de centaines d'espèces, couplées par des milliers de réactions, populations des atomes et molécules dans leurs états quantiques) et de la grande plage d'échelles spatiales et temporelles à résoudre. Nous développons donc depuis plusieurs années des axes originaux qui s'avèrent très fructueux et complémentaires, en utilisant au mieux les moyens de calcul intensif disponibles : centres de calculs nationaux, grille EGI-InSpire, mésocentres de calcul.

Les axes développés sont les suivants:

- Mise en place de bases de données de résultats de codes dédiés : simulations MHD du MIS à différentes échelles, description de la physico-chimie des régions de photo-dissociation (PDR) et des

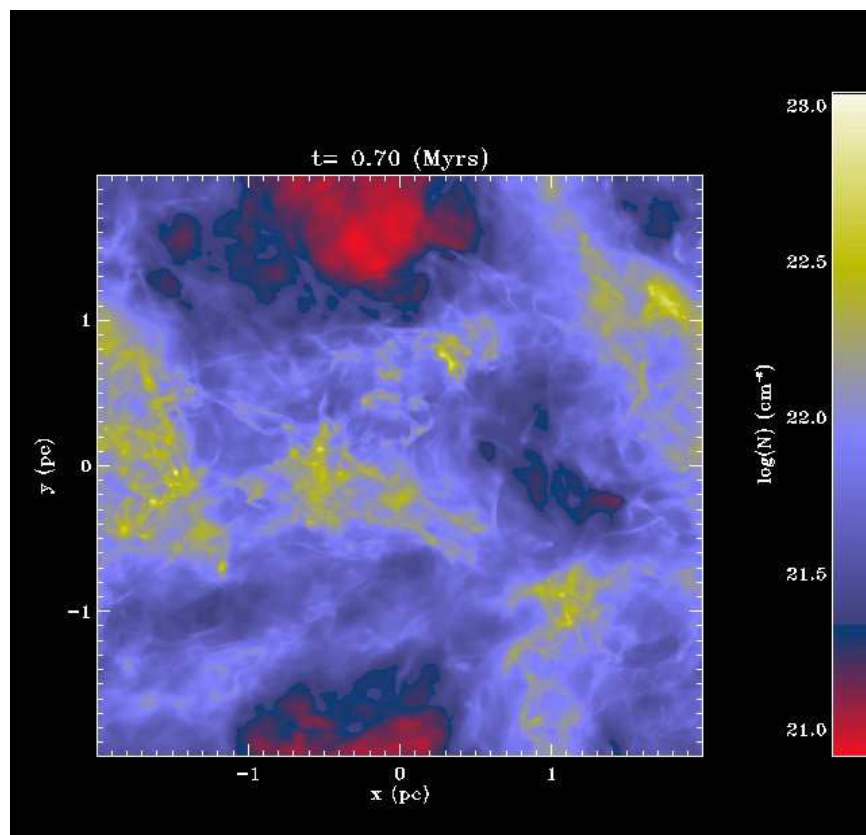
chocs dans le MIS.

- Développement de couplages entre codes de chimie et de dynamique, sous forme de post-processing, mais également à la volée.

A terme, nous souhaitons développer des interfaces de codes en ligne, pour faciliter l'accès des astrophysiciens aux outils de modélisation les plus modernes.

### Développements, utilisation des infrastructures :

La comparaison des modèles et des observations passe par la mise à disposition de résultats de simulations numériques accessibles simplement via des bases de données interrogeables. Ce souci d'accessibilité est au cœur de la mise en place des bases de données STARFORMAT (<http://starformat.obspm.fr>) et PDR (<http://pdr.obspm.fr>). La première permet à la communauté des astrophysiciens de consulter, visualiser et télécharger des résultats de simulations numériques de la dynamique du milieu interstellaire (formation des nuages moléculaires dans des flots convergents, simulations de turbulence magnétisée avec différents types de forçage, effondrement de cœurs denses préstellaires en présence de champ magnétique). Les simulations les plus simples sont réalisées sur le calculateur SGI ALTIX à 256 processeurs disponible à l'ENS Paris, les plus lourdes sur les calculateurs du CINES et de l'IDRIS. Ces simulations tridimensionnelles, réalisées avec le code à raffinement adaptatif de maillage RAMSES (Teyssier 2002, Fromang et al. 2006), fournissent à chaque pas de temps les champs de densité, de vitesse, ainsi que la structure du champ magnétique dans une boîte cubique modélisant une zone de gaz interstellaire. Elles prennent en compte l'effet de la turbulence et différents mécanismes de refroidissement et de chauffage.



*Exemple de simulation MHD disponible sur STARFORMAT : Densité de colonne du gaz dans une simulation de turbulence magnétisée en déclin dans une boîte de 4 parsec de côté.*

*Example of MHD simulation available on the STARFORMAT database : Total gas column density in a simulation of decaying magnetized turbulence in a box 4 parsecs on each side.*

La base de données PDR, quant à elle, fournit les résultats de modèles simples de régions de photodissociation en décrivant en détail, pour une géométrie unidimensionnelle et en régime stationnaire, la

chimie hors-équilibre impulsée par le rayonnement UV.

Ce code (Le Petit et al. 2006), ainsi que les simulations MHD de STARFORMAT, est utilisé dans le second aspect de notre travail, à savoir le développement d'interfaces entre codes, notamment dans le cadre de l'étude du couplage chimie-dynamique. Nous avons en effet post-traité un cube de données issu d'une simulation MHD de STARFORMAT (Hennebelle et al. 2008) avec le code PDR de Meudon, pour calculer la composition et le refroidissement du gaz le long de lignes de visée synthétiques (Levrier et al., 2012). La simulation contient 5 cubes de 8 Go chacun : densité, température et les 3 composantes de la vitesse, mais nous avons uniquement post-traité une infime partie de cette simulation (17500 pixels sur  $1024^3$ ). Le code PDR, unidimensionnel, résout de façon cohérente la chimie de plusieurs centaines d'espèces couplée au transfert de rayonnement. Ce dernier prend en compte l'absorption des photons dans le continu par les poussières interstellaires et dans les raies des atomes et molécules. Le système étant hors équilibre thermodynamique, le code calcule également explicitement l'équilibre statistique dans les états quantiques des principaux atomes et molécules en prenant en compte les processus radiatifs et collisionnels. Un run du code PDR sur un processeur unique peut prendre entre quelques heures et plusieurs jours en fonction de la précision demandée sur le transfert de rayonnement. Il s'agit d'un code public, largement utilisé par la communauté pour interpréter les observations du gaz moléculaire obtenues grâce aux grands équipements astronomiques.

Le code PDR peut prendre comme paramètre d'entrée un profil en densité unidimensionnel, et nous avons tiré partie de cette capacité pour coupler les simulations MHD au code PDR, et ainsi déterminer l'impact de la présence de fluctuations de densité – qui peuvent être grandes dans le MIS – sur la chimie du milieu. Nous avons ainsi extrait d'une simulation MHD publiée dans STARFORMAT une coupe 2D au travers d'une structure surdense. De cette coupe nous avons tiré respectivement 156 et 291 lignes de visée 1D dans deux directions perpendiculaires. Chacune de ces lignes de visée a été traitée par le code PDR, fournissant in fine environ 300 Mo de données.

L'ensemble des modèles 1D ont ensuite été assemblés en prenant, en chaque point de la structure, la composition chimique issue du run PDR (suivant la direction X ou la direction Y) pour lequel l'intensité de la radiation était la plus grande, ce qui correspond à faire l'hypothèse selon laquelle l'illumination en tout point est déterminée par l'illumination selon la direction de moindre extinction. Nous avons ainsi pu obtenir des cartes d'abondance des espèces chimiques majeures ( $H_2$ , C,  $C^+$ , CO), et évaluer la brillance dans les raies d'émission principales du gaz diffus ( $C^+$  et CO notamment), lesquelles peuvent être ensuite comparées aux données (ou dans le cas de la future mission SPICA/SAFARI de poser des contraintes sur les performances des instruments). Le travail de simulation permet aussi d'évaluer la fiabilité des différents traceurs utilisés par les observateurs pour quantifier la masse d'hydrogène moléculaire.

Le couplage entre codes à l'exécution est également un axe de développement, comme le montre l'exemple de CHEMSES, mariage entre le code DUMSES (RAMSES *for the dummies*, sans raffinement de maillage) et le code de choc Paris-Durham. Cette première version ne traite pas le champ magnétique. Nous avons commencé à exploiter cet outil dans plusieurs applications en utilisant un petit réseau chimique d'une quarantaine d'espèces qui a fait ses preuves dans les modèles de chocs moléculaires.

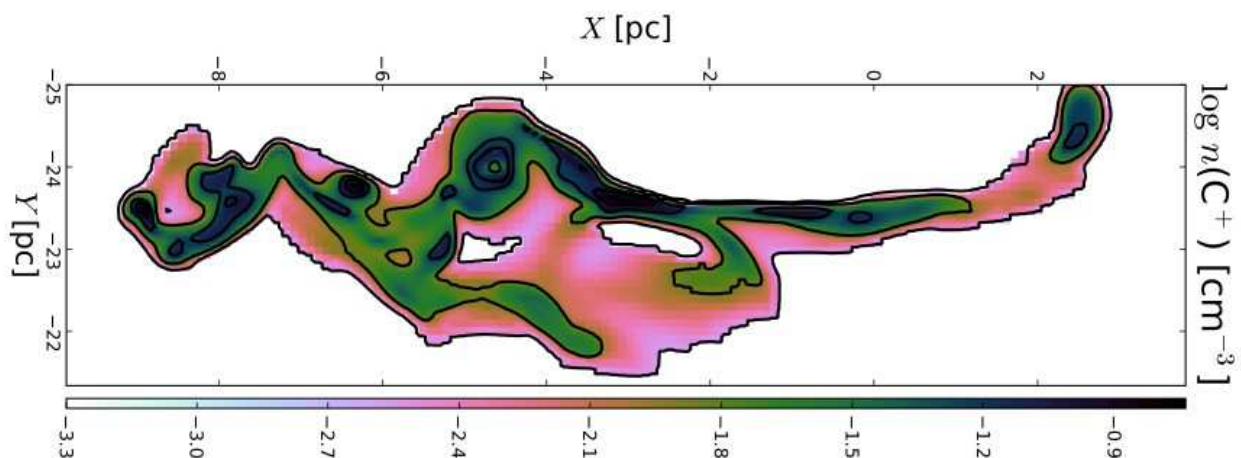
### **Outils, le cas échéant complémentarité des ressources, difficultés rencontrées :**

Les outils utilisés pour la réalisation des simulations numériques de turbulence MHD sont le calculateur SGI ALTIX à 256 cœurs du CEMAG-ENS, les machines de calcul du CINES (notamment JADE) et de l'IDRIS, et depuis peu le centre de calcul MESOPSL de Paris Sciences et Lettres. En 2013, nous avons obtenu et consommé environ 2 500 000 heures CPU sur ces ressources de calcul.

En ce qui concerne les modèles PDR, que ce soit pour la base de données de résultats, ou le post-traitement de simulations MHD, le code PDR a été porté sur la Grille EGI InSpire, afin de bénéficier de suffisamment de puissance calcul. Les runs (quelques centaines de modèles à chaque fois) ont été réalisés pour une partie sur la Grille EGI InSpire et pour une autre sur les machines du mésocentre MESOPSL. Les données et le code compilé sont déposés sur des Storage Elements (SE) et transmis avec les paramètres souhaités aux Computing Elements (CE) pour simulation. Les résultats obtenus sont ensuite récupérés sur les SE. L'une des difficultés, avec autant de modèles, est de disposer des outils nécessaires à la gestion des échecs et erreurs sur la Grille. Pour cela, nous avons développé différents scripts permettant de suivre l'exécution des jobs et d'identifier ceux qui échouent. Pour ceux-ci, une simulation dédiée et contrôlée sur un cluster local est en général ultérieurement nécessaire pour compléter la grille des modèles.

### **Résultats scientifiques :**

Le post-traitement de la simulation de turbulence MHD par le code PDR de Meudon nous a permis d'obtenir des cartes d'abondances chimiques telles que celles de la figure ci-après :



Exemple de carte d'abondance (ici pour C+) obtenue en post-traitant une coupe dans une simulation MHD de turbulence interstellaire avec le code PDR de Meudon. Les contours noirs indiquent les densités de gaz totales 20, 100, 500, 1000 et 2000 particules par  $\text{cm}^3$ .

Example of chemical abundance map (here for C+) obtained by post-processing a 2D cut in a simulation of interstellar MHD turbulence with the Meudon PDR code. Black contours indicate total gas densities of 20, 100, 500, 1000 and 2000 particles per  $\text{cm}^3$ .

La comparaison des abondances obtenues avec des simulations PDR effectuées sur des profils de densité uniforme nous a permis de montrer que les fluctuations de densité du MIS amènent à un enrichissement du milieu en espèces chimiques telles que  $\text{H}_2$ , CO, CH et CN, par un facteur de l'ordre de 2 à 4. Les corrélations entre les densités de colonne de CO, CH et CN et celle de  $\text{H}_2$  sont également en meilleur accord avec les observations lorsque les fluctuations de densité sont prises en compte. En particulier, l'abondance relative par rapport à  $\text{H}_2$  du radical CH confirme que ce dernier est un bon traceur de l'hydrogène moléculaire. En revanche, l'utilisation de CO sous-estime la masse de gaz moléculaire diffus car  $\text{H}_2$  existe dans des régions illuminées par le rayonnement ambiant, où CO est détruit.

Cette déficience en CO par rapport aux relations observées indique que d'autres voies d'enrichissement chimique du MIS doivent être explorées, notamment via la dissipation de la turbulence. Pour ce faire, des simulations de turbulence MHD incompressibles et compressibles ont été réalisées au CINES et sur les machines de MESOPSL, par Giorgos Momferratos et Pierre Lesaffre. La dissipation de la turbulence MHD peut prendre trois formes : chauffage ohmique, dissipation visqueuse, ou bien encore friction entre espèces ionisées et neutres (diffusion ambipolaire), que nous modélisons toutes les trois dans nos simulations. Nous souhaitons ainsi préciser la géométrie et la dynamique de ces structures dissipatives afin de les caractériser chimiquement et observationnellement.

Dans la même optique, le couplage CHEMSES nous a permis de réaliser des simulations 2D de turbulence en déclin, qui montrent que la dissipation visqueuse de la turbulence permet de produire des molécules difficiles à obtenir par d'autres voies car leurs chemins de formation sont parfois fortement endothermiques. Nous avons commencé à faire fonctionner l'interface de CHEMSES directement avec RAMSES pour décrire la chimie dans les effondrements de cœurs pré-stellaires, en prévision de l'inclusion de la chimie dans les modèles du milieu interstellaire plus diffus.

## Perspectives :

L'étude menée en post-traitant une simulation MHD avec le code PDR de Meudon a permis de montrer que la prise en compte de structures en densité réalistes rend mieux compte de la composition chimique du gaz interstellaire. Nous continuons d'exploiter les résultats obtenus, notamment pour établir des diagnostics fiables sur le taux d'ionisation du MIS par les rayons cosmiques, fondés sur l'observation des hydrures légers, tels  $\text{H}_3^+$ . À plus ou moins long terme, les axes d'amélioration sont multiples :

- Pour traiter plus correctement l'approche de la chimie interstellaire contrôlée par l'UV dans des régions turbulentes du MIS, nous avons entrepris d'améliorer la prise en compte du chauffage par les photons dans les simulations MHD, via un module intégré dans RAMSES permettant l'estimation de l'extinction en

chaque point de la grille de calcul (travail de thèse de V. Valdivia).

- Actuellement, pour des raisons de puissance de calcul, notre étude a été faite sur une coupe 2D d'une simulation MHD. Dans le futur, nous souhaitons réaliser le même type de travail sur des cubes 3D. La principale limite est le nombre de processeurs disponibles. Pour cela nous envisageons soit d'utiliser encore plus largement la Grille EGI InSpire, soit de porter le code PDR et nos procédures sur des infrastructures de calcul national. L'utilisation de la Grille EGI nécessitera de développer des scripts encore plus robustes et performants pour gérer une grande masse de modèles numériques, voire intégrer notre modèle à des outils développés pour la Grille permettant de gérer massivement des jobs.

- Dans le cadre des simulations CHEMSES, nous réfléchissons à des méthodes de réduction du réseau consistant par exemple à mettre certaines réactions à l'équilibre en fonction des conditions physico-chimiques, pour modéliser les interfaces de nuages moléculaires entre milieu chaud et froid, car les échelles de temps chimiques sont trop différentes dans les deux milieux pour l'intégrateur chimique.

- Par ailleurs, nous comptons implémenter le code TDR (Turbulent Dissipation Region, Godard et al. 2009) dans CHEMSES, en utilisant les résultats de simulations de turbulence MHD pour mieux modéliser les lignes de visée synthétiques.

Ces améliorations bénéficieront par ailleurs des progrès réalisés en termes de dynamique d'échelles spatiales sur les simulations de turbulence MHD interstellaire. En particulier, nous allons réaliser des simulations de type "zoom" qui permettront d'accroître la gamme d'échelles couvertes et feront le lien entre les très grandes échelles galactiques et les proto-étoiles. Ces simulations seront réalisées dans un premier temps sur les grands calculateurs nationaux (machine TURING de l'IDRIS) puis sur les plus grands calculateurs européens par l'intermédiaire d'une demande PRACE.

Enfin, nous souhaitons à terme permettre à la communauté des astrophysiciens de lancer des codes de simulation en ligne. En effet, si la mise à disposition de résultats de simulations sous forme de bases de données interrogeables permet aux utilisateurs de trouver, parmi les modèles disponibles en ligne, celui qui convient le mieux à l'interprétation de leurs données observationnelles, elle n'autorise pas un ajustement des paramètres plus précis que celui imposé par les auteurs des simulations. C'est pourquoi nous développons des outils pour permettre aux utilisateurs de lancer des codes en ligne, avec les valeurs de paramètres les plus appropriées. Ce développement, limité aux codes les moins lourds (il est exclu de proposer aux utilisateurs de lancer une simulation MHD sur grille adaptative), implique un travail important de description du code et de validation des paramètres d'entrée, afin de rendre l'utilisation de l'outil la plus conviviale possible.

## Références :

Fromang, Hennebelle, Teyssier, A&A, 457, 371, 2006  
Godard, Falgarone, Pineau Des Forêts, A&A, 495, 847, 2009  
Le Petit, Nehmé, Le Bourlot, Roueff, ApJS, 164, 506, 2006  
Levrier, Le Petit, Hennebelle, Lesaffre, Gerin, Falgarone, A&A, 544, 22, 2012  
Teyssier, A&A, 385, 337, 2002